

Title	(4)高次分布関数とCumulant平均の問題(液体金属の構造と物性,基研研究会報告)
Author(s)	米沢, 富美子
Citation	物性研究 (1970), 14(6): B12-B14
Issue Date	1970-09-20
URL	http://hdl.handle.net/2433/88140
Right	
Type	Departmental Bulletin Paper
Textversion	publisher

松浦 満・米沢富美子

性質，及びそれを反映したイオンの性質を論ずる際には，d レベルがより一層重要であり，d レベルをあらわに取扱い方法が有効であると考えられる。

文 献

W.A.Harrison, Phys. Rev. 181, 1036 (1969)

J.A.Moriarty, Phys. Rev. B1, 1363 (1970)

V.Bortslani and C.Calandra Phys. Rev. B 1, 2405 (1970)

(4) 高次分布関数と Cumulant 平均の問題

東工大・理 米 沢 富 美 子

液体金属のイオン配置の高次分布関数に対する系統的な近似法を確立するための，ひとつのアプローチとして，多体分布関数を Cumulant 展開し，Cumulant な高次の相関関数のみたすべき必要条件を，確率論的考察及び物理的考察によって導く。これは，高次相関関数の近似形が，物理的に要請される当然の条件をみたしていないためにおこる不都合や間違った極限值をさけるためである。

空間の任意の点 R に液体原子（イオン）が存在する確率を確率変数（random variable） ξ_R を使って表現する。 ξ_R は，点 R 上に液体原子がある場合には 1，ない場合には 0 をとる。いま， s 個の点 R_1, R_2, \dots, R_s に割り当てられた s 個の確率変数が $\xi_{R_1}, \xi_{R_2}, \dots, \xi_{R_s}$ をとる同時確率を $\rho_s(\xi_{R_1}, \xi_{R_2}, \dots, \xi_{R_s})$ で与える。 ρ_s は変数 $\xi_{R_1}, \xi_{R_2}, \dots, \xi_{R_s}$ に関して対称である。又空間的に均一の場合を考えると， ρ_s は s 個の位置 R_1, R_2, \dots, R_s の絶対的な空間座標にはよらず，相対的な配置（自由度 $s-1$ ）のみに依存する。 ρ_s に対する境界条件は，

$$\rho_{s-1}(\xi_{R_1}, \dots, \xi_{R_{s-1}}) = \sum_{\xi_{R_s}} \rho_s(\xi_{R_1}, \xi_{R_2}, \dots, \xi_{R_s}) \quad (1)$$

但し $\varphi_0 \equiv 1$ である。密度を $\rho = N/V$ とおくと、 $\varphi_1(\xi)$ は

$$\varphi_1(\xi) = \rho \xi + (1-\rho)(1-\xi) \quad (2)$$

となる。 s 次の分布関数を、 s 次以下の Cumulant な分布関数 $h_t(\xi_{R'_1}, \dots, \xi_{R'_t})$ ($t \leq s$) で展開すると、一般に

$$\begin{aligned} \varphi_s(\xi_{R_1}, \dots, \xi_{R_s}) = & \sum_{(t+u+\dots=s)} h_t(\xi_{R'_1}, \xi_{R'_2}, \dots, \xi_{R'_t}) \\ & \times h_u(\xi_{R''_1}, \xi_{R''_2}, \dots, \xi_{R''_u}) \times \dots \end{aligned} \quad (3)$$

という形に書ける。ここで和 ($t+u+\dots=s$) は s 個の変数 R_1, \dots, R_s を s 次以下の Cluster に分ける分け方の全てについて行う。又 $h_1(\xi) \equiv \varphi_1(\xi)$ である。Cumulant 相関関数 $h_s(\xi_{R_1}, \dots, \xi_{R_s})$ は、空間的均一性と、 s 個の変数に関する対称性を考慮して、一般に

$$\begin{aligned} h_s(\xi_{R_1}, \xi_{R_2}, \dots, \xi_{R_s}) = & \lambda_t(R_{12}, R_{23}, \dots, R_{s-1s}) \\ & \times \prod_{j=1}^s (2\xi_{R_j} - 1) \end{aligned} \quad (4)$$

で与えられることが証明できる。ここで $\lambda_s(R_{12}, \dots, R_{s-1s})$ は、 $(s-1)$ 個の相対的な座標 R_{12}, R_{23}, R_{s-1s} のみの関数で、 s 体分布関数 $\rho^{(s)}(R_1, R_2, \dots, R_s)$ の Cumulant な部分に相当する。

φ_s を Cumulant な部分に展開した方が便利なのは、 φ_s のもつ情報のうち、それより低次の φ_t ($t < s$) あるいは λ_t ($t < s$) の和や積であらわし切れない、いわば“正味の” s 体の効果が、Cumulant な相関関数 h_s の中に集約されていると考えられるからであり、又、グリーン関数法で摂動論を用いるような formulation の際にも、ダイソン方程式を定義する自己エネルギーの部分が h_s を使って計算されるからである。更には、 φ_s の性質から、ある極限での h_s に課せられる条件を逐次決める上にも、(3) 式の様な展開形は便利である。例えば 2 体の確率分布関数 φ_2 で $R_1 = R_2$ の時には

$$\begin{aligned}\rho_2(\xi_R, \xi_R) &= n_1(\xi_R)n_1(\xi_R) + n_2(\xi_R, \xi_R) \\ &\equiv \rho_1(\xi_R)\end{aligned}\quad (5)$$

という要請から,

$$n_2(\xi_R, \xi_R) = \rho_1(\xi_R) \{ \rho_1(\xi_R) - 1 \} \quad (6)$$

となることがわかる。同様にして n_3 以上についてもいくつかの条件が得られる。

この様にして, $n_s(\xi_{R_1}, \dots, \xi_{R_s})$ あるいは $\lambda_s(R_1, \dots, R_s)$ のみたすべき条件が得られる。それは又, 近似された s 体相関関数の兼備えているべき必要条件でもある。

(5) 中性単原子液体と液体金属の時空構造の差異は 2粒子間相互作用の特徴のどこを反映するか

東北大・工 田 中 実

古典液体の時空構造, $G(r, t)$, $g(r)$, $S(Q, \omega)$, $S(Q)$, 更に速度自己相関関数 $\Psi(t)$, そのスペクトル等の諸量には, 2粒子間相互作用 $\phi(R_{ij})$ (原子間; イオン間有効相互作用) の特徴が反映している。

まず, 希ガス液体 (A, Kr etc.) については古くから Lennard-Jones ポテンシャルを $\phi(R_{ij})$ にとって, 統計力学的計算, あるいは simulation が試みられ, 上記諸量の実験的情報との比較検討が試みられて来た。

他方, 液体金属内のイオン間相互作用は, 伝導電子系の遮蔽効果を正しくとり入れて始めて理解されるもので, 結果は Lennard-Jones 型よりもっと複雑であろう。このように予想される2粒子間相互作用の特徴の差が, 実験的に得られた上記の時空構造にかかわる諸量に, 液体金属と中性液体との場合の特徴的差異をもち来たしていよう。

まず, Johnson-Hutchinson-March は, 実験値の $g(r)$ から統計力学的近似手法で $\phi(R_{ij})$ を求めた。アルゴンではまさしく L-J ポテンシャルで